

# Fotoelektronien kulmajakaumat elektronispektroskopiassa

Pro gradu-tutkielma  
Salla Lapinkangas  
Matemaattisten tieteiden yksikkö  
Oulun yliopisto  
Syksy 2020

# Sisällys

<b>Johdanto</b>	<b>2</b>
<b>1 Avaruuskulma</b>	<b>4</b>
<b>2 Pallotrigonometria</b>	<b>5</b>
<b>3 Legendren polynomit</b>	<b>8</b>
3.1 Peruskäsitteitä . . . . .	8
3.1.1 Funktioavaruus . . . . .	8
3.1.2 Sisätulo . . . . .	8
3.1.3 Ortogonaaliset polynomit . . . . .	9
3.1.4 Painofunktio . . . . .	9
3.2 Legendren polynomit . . . . .	9
3.3 Normalisoidut ja assosioidut Legendren polynomit . . . . .	13
3.4 Schmidtin assosioidut ortogonaaliset Legendren polynomit . . .	16
<b>4 Laplacen yhtälön ratkaisu pallokoordinaatistossa</b>	<b>18</b>
<b>5 Fysiikan ja Legendren polynomien yhteys</b>	<b>20</b>
5.1 De Broglien hypoteesi . . . . .	20
5.2 Aaltofunktio . . . . .	20
5.3 Kolmiulotteista kvanttimekaniikkaa . . . . .	21
5.4 Schrödingerin yhtälö vetyatomilla . . . . .	21
<b>6 Fotoelektronien kulmajakaumat spektrometriassa</b>	<b>24</b>
6.1 Kulmaparametrin lausekkeen johto käyttäen Schmidtin assosioitujen Legendren polynomien summausta . . .	27
6.2 Kulmaparametrin lausekkeen johto käyttäen neliöön korotusta . . . . .	31
<b>7 Tulosten tarkastelu</b>	<b>35</b>
7.1 Kulmaparametrin virhe, kun detektori on ympyrämäinen . . .	36
7.2 Kulmaparametrin virhe pienemmällä kulma-aukeamalla . . . .	38
<b>8 Yhteenveto</b>	<b>40</b>
<b>Lähdeluettelo</b>	<b>40</b>

## Johdanto

Osittaisdifferentiaaliyhtälöt ovat fysiikassa yksi keskeisimmistä matemaattisista välineistä [1]. Fysiikassa keskitytään ymmärtämään luonnon peruslakeja, joille on ominaista se, että ne ovat pitkälti deterministisiä eli systeemin tuleva käyttäytyminen voidaan ennustaa, kun sen alkutila ja sitä kuvaava laki tiedetään [2]. Tällöin saadaan selville, miten systeemiä kuvaavat parametrit muuttuvat pienellä aikavälillä, ja tämän relaation matemaattinen kuvaus on usein osittaisdifferentiaaliyhtälö [2]. Fysiikan ongelmien tarkempi kuvaaminen ei kuitenkaan aina ole kovin suoraviivaista, sillä systeemiä kuvaavat lait pätevät paremmin yksinkertaistetuille tilanteille.

Tässä Pro gradu-tutkielmassa perehdytään fotoelektronispektroskopiassa ilmenevään ongelmaan, jonka ratkaisemiseen tarvitaan sekä pallotrigonometriaa että Legendren polynomeja. Fotoionisaatiossa atomeista tai molekyyleistä voi irrota elektroneja, kun niihin osuu fotoni, jolla on riittävän suuri energia. Irronneet elektronit voidaan havaita detektorilla, jonka sisätuloaukon koko on äärellinen. Usein oletetaan, että detektorit havaitsevat elektroneja vain tietyllä kulman arvolla, vaikka todellisuudessa detektori havaitsee elektroneja tietyllä kulma-aukeamalla. Tutkielman tarkoitus onkin selvittää, millainen vaikutus tällä yksinkertaistamisella on kulmajakaumaparametrin arvoon.

Pallotrigonometria ja sen tutkimus johtaa juurensa käytännön tarpeisiin mitata matkaa ja navigoida paikasta toiseen maapallon pinnalla sekä löytää työkaluja maapallon tutkimiseen ja kuvantamiseen karttojen avulla. Pallotrigonometriaa tarvitaan fysiikan ongelmien ratkaisemiseen siis tilanteissa, joissa tarkastellaan pallopinnalla määriteltäviä funktioita. Tutkimuksen kohteena pallotrigonometriassa ovat kaaret eli ympyröiden kehien osat pallon pinnalla olevien pisteiden välillä. Pisteiden paikka kolmiulotteisessa avaruudessa voidaan määrittellä kolmen suureen avulla. Ne voivat olla kolme suorakulmaista koordinaattia, mutta muitakin vaihtoehtoja on. Yksi hyvin usein käytetty vaihtoehto on pallokoordinaatisto, jossa paikka ilmoitetaan kahden kulman  $\theta$  ja  $\phi$  ja etäisyyden  $r$  avulla. [3]

Legendren polynomit muodostavat ortogonaalisen järjestelmän, jolla on valtava määrä matemaattisia ominaisuuksia [1]. Näiden ominaisuuksien johdosta Legendren polynomeilla onkin monenlaisia yhteyksiä sekä matematiikan että fysiikan sovelluksissa [1]. Tutkielmassa tullaan näyttämään, että nämä Legendren polynomit saadaan myös differentiaaliyhtälöiden ratkaisuna. Fysiikassa Legendren differentiaaliyhtälöä tarvitaan, kun ratkaistavana on Laplacen operaattori pallokoordinaateissa. Legendren polynomit mahdollistavat myös pallofunktioiden ilmaisemisen ortogonaalisina polynomeina, kun pallotrigonometrian ominaisuuksia yhdistetään Legendren polynomien

ominaisuuksiin[4].

Luvuissa 1, 2 ja 3 esitetään lyhyt teoria avaruuskulmasta, pallotrigonometriasta ja Legendren polynomeista. Lisäksi luvussa 4 selitetään tarkemmin, millainen on Laplacen differentiaaliyhtälön ratkaisu pallokoordinaatistossa. Näihin ei paneuduta kuitenkaan kovin syvällisesti, sillä tutkielman pääpaino on ratkaista fotoelektronien kulma-aukeamaan liittyvä ongelma fotoelektronispektroskopiassa. Luvussa 6 tämän ongelman tausta esitetään tarkemmin, mutta ennen tätä luvussa 5 perehdytään siihen, mistä Legendren polynomit tulevat fysiikan ongelmiin. Tarkasteltavalle ongelmalle esitetään kaksi erilaista ratkaisutapaa, joista toisessa tarvitaan enemmän Legendren polynomien tuloksia. Vaikka eri ratkaisutapojen avulla saadut yhtälöt ovat hieman erinäköiset, niiden antamat tulokset ovat kuitenkin ekvivalentit keskenään. Luvussa 6 käsitellään tuloksia ja lasketaan, millainen virhe kulmaparametrin arvolle syntyy, kun spektrofotometrin detektorin oletetaan olevan pistemäinen, vaikka se ei sitä todellisuudessa ole.

# 1 Avaruuskulma

**Määritelmä 1.** *Avaruuskulma*  $\Omega$  on pallon pinnalla olevan pinta-alan  $A$  suhde säteen  $r$  neliöön [5] eli

$$\Omega = \frac{A}{r^2} \quad (1)$$

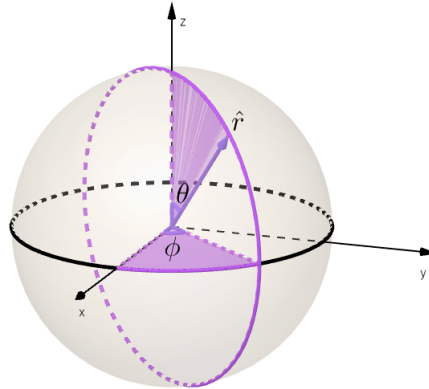
**Määritelmä 2.** Kun käytetään pallokoordinaatteja, niin avaruuskulma voidaan määrittää pintaintegraalina pinnan  $S$  yli

$$\Omega = \int \int_S \sin \theta d\theta d\phi \quad (2)$$

Tällöin *differentiaalinen avaruuskulma* on

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \sin \theta d\theta d\phi \quad (3)$$

missä  $\theta$  ja  $\phi$  ovat atsimuutti- ja elevaatiokulmat (Kuva 1). [5]



Kuva 1: Leveysaste  $\theta$  ilmaisee pohjois-etelä-suuntaisen sijainnin ja pituusaste  $\phi$  itä-länsi-suuntaisen sijainnin pallon pinnalla.

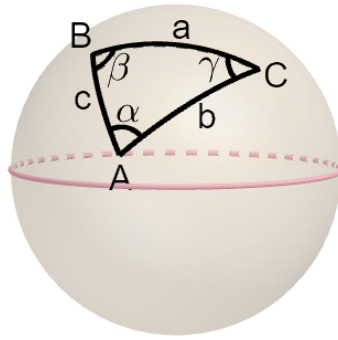
Pallokoordinaatistossa tilavuuselementit saadaan seuraavasta differentiaalisesta [6].

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (4)$$

## 2 Pallotrigonometria

**Määritelmä 3.** Olkoon  $P$   $r$ -säteinen ( $r > 0$ ) pallo, jonka keskipiste on  $O$ . Pallon ja tason  $T$  leikkausta kutsutaan *isoympyräksi*, jos taso  $T$  kulkee keskipisteen  $O$  kautta. Tason  $T$  leikatessa pallon etäisyydellä  $x$  keskipisteestä  $O$ , missä  $0 < x < r$ , tason  $T$  ja pallon  $P$  leikkausta kutsutaan *pikkuympyräksi*. [3]

**Määritelmä 4.** Olkoon  $A$ ,  $B$  ja  $C$   $r$ -säteisen pallon pisteitä  $P$  siten, että yksikään isoympyrä ei sisällä niitä kaikkia ja  $r > 0$ . Tällöin *pallokolmio*  $ABC$  muodostuu isoympyrän kaarien yhdisteestä  $\widehat{AB} \cup \widehat{BC} \cup \widehat{CA}$ , missä  $\widehat{AB}, \widehat{BC}, \widehat{CA} < 180^\circ$ . Kaaria kutsutaan kolmion sivuiksi ja kaarien leikkauspisteitä kolmion kärjiksi. [3]



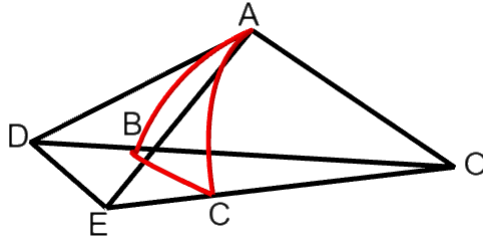
Kuva 2: Pallokolmio  $ABC$ .

**Lause 1.** *Pallotrigonometrian (Kuva 2) kosinilause on*

$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cos \alpha \quad (5)$$

*Todistus.* Olkoon  $ABC$  pallokolmio ja  $O$  tämän ympyrän keskipiste.

Olkoon kaaren  $AC$  tangentti pisteessä  $C$   $OE$  ja kaaren  $AB$  tangentti pisteessä  $B$   $OD$  siten, että kulmat  $\angle OAE$  ja  $\angle OAD$  ovat suoria kulmia. Nyt kulma  $\angle EAD$  on yhtä suuri kuin pallokolmion kulma  $\angle A = \alpha$  ja kulma  $\angle EOD$  vastaa nyt kaaren pituutta  $a$ . (Katso kuva 3.)



Kuva 3: Pallotrigonometrian kosinilauseen todistaminen.

Nyt tasogeometrian kosinilauseen nojalla saadaan, että

$$DE^2 = AD^2 + AE^2 - 2 \cdot AD \cdot AE \cdot \cos \alpha \quad (6)$$

ja

$$DE^2 = OD^2 + OE^2 - 2 \cdot OD \cdot OE \cdot \cos a \quad (7)$$

Lisäksi saadaan, että

$$OD^2 = AD^2 + OA^2 \quad (8)$$

ja

$$OE^2 = AE^2 + OA^2 \quad (9)$$

Vähennetään yhtälöstä (6) yhtälöt (7)-(9). Tällöin

$$0 = OA^2 + AD \cdot AE \cdot \cos \alpha - OD \cdot OE \cdot \cos a,$$

joten

$$\cos a = \frac{OA}{OE} \cdot \frac{OA}{OD} + \frac{AE}{OE} \cdot \frac{AD}{OD} \cdot \cos \alpha$$

eli

$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cdot \cos \alpha$$

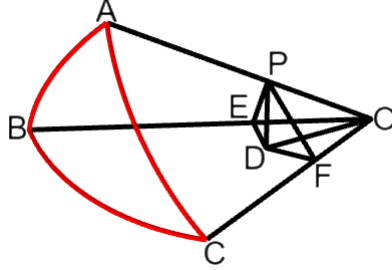
□

[3]

**Lause 2.** *Pallotrigonometrian sinilause on*

$$\frac{\sin a}{\sin \alpha} = \frac{\sin b}{\sin \beta} = \frac{\sin c}{\sin \gamma} \quad (10)$$

*Todistus.* Olkoon  $ABC$  pallokolmio ja  $O$  tämän pallon keskipiste.



Kuva 4: Pallotrigonometrian sinilauseen todistaminen.

Olkoon  $P$  mielivaltainen piste janalla  $OA$  ja  $D$  piste tasolla  $OBC$  siten, että jana  $PD$  on kohtisuorassa tasoa  $OBC$  vastaan. Lisäksi olkoon  $E$  piste janalla  $OB$  siten, että  $DE$  ja  $OB$  ovat kohtisuorassa keskenään. Vastaavasti  $F$  on piste janalla  $OC$  siten, että  $DF$  ja  $OC$  ovat kohtisuorassa keskenään.

Koska  $PD$  on kohtisuorassa tason  $OBC$  suhteen, niin se muodostaa suoran kulman jokaisen tällä tasolla olevan suoran kanssa. Siten

$$PE^2 = PD^2 + DE^2 = PO^2 - OD^2 + DE^2 = PO^2 - OE^2$$

ja kulma  $\sphericalangle PEO$  on suora kulma. Tällöin

$$PE = OP \sin(\sphericalangle POE) = OP \sin c$$

ja

$$PD = PE \sin(\sphericalangle PED) = PE \sin \beta = OP \sin c \sin \beta.$$

Vastaavasti

$$PD = OP \sin b \sin \gamma,$$

joten

$$OP \sin c \sin \beta = OP \sin b \sin \gamma$$

ja

$$\frac{\sin \beta}{\sin \gamma} = \frac{\sin b}{\sin c}.$$

Muut tapaukset todistetaan vastaavalla tavalla. □

[3]



### 3 Legendren polynomit

Tässä osiossa perehdytään Legendren polynomeihin sekä assosioituihin Legendren polynomeihin. Assosioiduille Legendren polynomeille käytetään myös nimitystä Legendren liittofunktiot tai Legendren liittopolynomit. Lisäksi luvussa 4.4 esitellään Schmidtin assosioidut Legendren polynomit. Jotta assosioitujen ja Schmidtin assosioitujen Legendren polynomien merkinnät eivät sekoittuisi keskenään, niin merkitään assosioituja Legendren polynomeja nyt merkinnällä  $P_{n,m}$  ja Schmidtin assosioituja Legendren polynomeja  $P_n^m$ . Luvussa 4.3 esitetään lyhyesti myös normalisoitujen ja assosioitujen Legendren polynomien  $\bar{P}_{n,m}$  teoria.

#### 3.1 Peruskäsitteitä

##### 3.1.1 Funktioavaruus

**Määritelmä 5.** *Funktioavaruus* on sellainen funktiojoukko  $\mathcal{F}$ , jolla on seuraavat ominaisuudet

1. joukon  $\mathcal{F}$  funktioilla on sama määrittäjäjoukko  $W$ ,
2.  $af + bg \in \mathcal{F}$  aina, kun  $f, g \in \mathcal{F}$  ja  $a, b \in \mathbb{R}$ , missä  $(af + bg)(x) = af(x) + bg(x)$  ja  $x \in W$ .

[7]

*Huomautus* 1. Joukko

$$L^2(J) = \left\{ f : J \rightarrow \mathbb{R} \mid |f|^2 \text{ on integroitava ja } \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

on funktioavaruus. [7]

##### 3.1.2 Sisätulo

**Määritelmä 6.** Funktioavaruuden  $\mathcal{F}$  *sisätulo* on kuvaus, joka liittää jokaiseen avaruuden  $\mathcal{F}$  funktiopariin  $(f, g)$  reaaliluvun  $\langle f|g \rangle$ , ja sillä on seuraavat ominaisuudet. [7]

1.  $\langle f|f \rangle \geq 0$  ja  $\langle f|f \rangle = 0$  jos ja vain jos  $f = \emptyset$ , missä  $\emptyset$  on nollafunktio.
2.  $\langle f|g \rangle = \langle g|f \rangle$
3.  $\langle af + bg|h \rangle = a\langle f|h \rangle + b\langle g|h \rangle$  kaikilla  $f, g, h \in \mathcal{F}$  ja  $a, b \in \mathbb{R}$ .

### 3.1.3 Ortogonaaliset polynomit

**Määritelmä 7.** Funktioavaruuden  $\mathcal{F}$  funktiot  $f$  ja  $g$  ovat *ortogonaaliset*, jos  $\langle f|g \rangle = 0$ . Tälle käytetään merkintää  $f \perp g$ .

Funktioavaruuden  $\mathcal{F}$  funktiojonoa  $(f_n)_{n=1}^\infty$  sanotaan *ortogonaaliseksi*, jos  $\langle f_j|f_k \rangle = 0$ , kun  $j \neq k$ . [7]

### 3.1.4 Painofunktio

**Määritelmä 8.** *Painofunktio* on välillä  $(a, b)$ , missä  $-\infty \leq a < b \leq \infty$ , määritelty jatkuva positiiviarvoinen funktio  $\omega$ , jolle

$$\int_a^b \omega(x)x^n dx < \infty \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

[7]

**Määritelmä 9.** Painofunktion  $\omega$  suhteen *ortogonaalinen polynomijono*  $(\varphi_n)_{n=0}^\infty$  on sellainen joukko funktioita  $\varphi_n$ , että  $\varphi_n$  on  $n$ :nnen asteen polynomi ja

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \int_a^b \omega(x) \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad n \neq m.$$

[7]

## 3.2 Legendren polynomit

**Määritelmä 10.** Legendren polynomit ovat seuraavan differentiaaliyhtälön ratkaisuja

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} \right] + n(n+1)P_n(x) = 0 \quad (11)$$

[1]

**Määritelmä 11.** Legendren polynomit  $P_n(x)$  ( $n$  on polynomin aste ja  $x \in [-1, 1]$ ) ovat *ortogonaalisia polynomeja*, kun ne toteuttavan seuraavan yhtälön

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x), \quad (12)$$

missä  $n = 1, 2, 3, \dots$  ja  $P_0(x) = 1$  ja  $P_1(x) = x$ . [1], [8]

Nyt siis polynomien  $P_1$  ja  $P_2$  ortogonaalisuus perustuu polynomien  $P_0$  ja  $P_1$  ortogonaalisuuteen jne. Näin ollen  $P_m$  ja  $P_n$  ovat ortogonaaliset  $\forall m < n$ .

**Määritelmä 12.** Ortogonaaliset Legendren polynomit voidaan ratkaista *Rodriguesin kaavalla*

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (13)$$

[1]

**Lause 3.** Legendren polynomit ovat ortogonaalisia avaruudessa  $L^2(-1, 1)$  painofunktion  $\omega(x) \equiv 1$  suhteen ja

$$\langle P_n, P_m \rangle = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (14)$$

missä  $\delta_{mn}$  on Kroneckerin delta ( $\delta_{mn} = 1$ , jos  $m = n$  ja  $\delta_{mn} = 0$ , jos  $m \neq n$ .) [1]

*Todistus.* Tarkastellaan erikseen tapaukset, missä  $m \neq n$  ja  $m = n$ .

$m \neq n$  Nyt yhtälön (5) mukaan

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_n(x)] + \lambda_n P_n(x) = 0$$

ja

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_m(x)] + \lambda_m P_m(x) = 0,$$

missä  $\lambda_n = n(n+1)$  ja  $\lambda_m = m(m+1)$ . Kerrotaan näistä yhtälöistä ylempi  $P_m(x)$ :llä ja alempi  $P_n(x)$ :llä, ja suoritetaan vähennyslasku saaduilla yhtälöillä. Tällöin

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_n(x)]P_m(x) - \frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_m(x)]P_n(x) + (\lambda_n - \lambda_m)(P_m(x)P_n(x)) = 0$$

ja

$$\begin{aligned} (\lambda_m + \lambda_n) \int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx &= \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_n(x)]P_m(x) \right. \\ &\quad \left. - \frac{d}{dx}[(1-x^2)P'_m(x)]P_n(x) \right\} dx \\ &= \int_{-1}^1 \frac{d}{dx} \{ (1-x^2)[P_m(x)P'_n(x) - P_n(x)P'_m(x)] \} dx \\ &= \int_{-1}^1 (1-x^2)[P_m(x)P'_n(x) - P_n(x)P'_m(x)] dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

Nyt  $\lambda_n \neq \lambda_m$ , sillä  $m \neq n$  ja  $m(m+1) \neq n(n+1)$ . Tällöin  $m(m+1) - n(n+1) \neq 0$ , joten  $\lambda_m - \lambda_n \neq 0$ . Täytyy siis olla, että  $\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = 0$ , kun  $m \neq n$ .

$m = n$  Nyt yhtälön (13) mukaan

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} \frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} dx$$

Osittaisintegroinnilla  $n$  kertaa ja huomioimalla, että sijoitustermi on joka kerta nolla, koska termin  $(x^2-1)^n = (x-1)^n(x+1)^n$  derivaatat häviävät sijoituksilla  $x = -1$  ja  $x = 1$  kertalukuun  $n-1$  saakka, saadaan

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx &= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (-1)^n (2n)! (x^2-1)^n dx \\ &= \frac{(-1)^n (2n)!}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^n dx \end{aligned}$$

Koska

$$\int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = (-1)^n \cdot 2 \cdot \frac{2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot 2n}{3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n+1)}$$

niin

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}$$

Eli

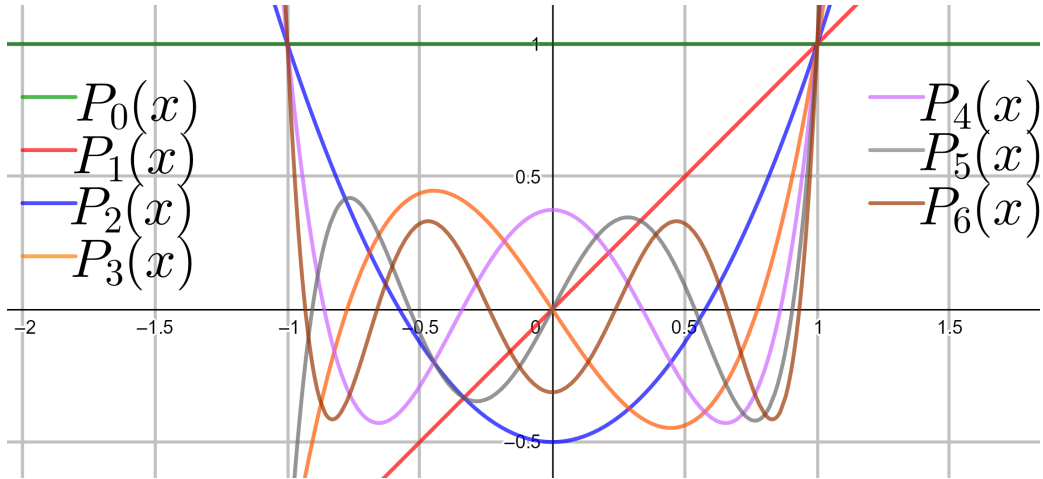
$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn},$$

missä  $\delta_{mn}$  on 0 tai 1. □

Taulukossa 1 on esitetty 7 ensimmäistä Legendren polynomia ja kuvassa 5 niiden kuvaajat. [1]

Taulukko 1: Seitsemän ensimmäistä Legendren polynomia.

$n$	$P_n(x)$
0	1
1	$x$
2	$\frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
3	$\frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$
4	$\frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
5	$\frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$
6	$\frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)$



Kuva 5: Legendren polynomien kuvaajia.

### 3.3 Normalisoidut ja assosioidut Legendren polynomit

**Määritelmä 13.** *Assosioidut Legendren polynomit* ovat seuraavan differentiaaliyhtälön, missä  $-1 \leq x \leq 1$  ja  $0 \leq m \leq n$  ( $m$  on assosioidun Legendren polynomin kertaluku.), ratkaisuja. [4],[9]

$$\frac{d}{dx} \left[ (x^2 - 1) \frac{dP_{n,m}(x)}{dx} \right] - \left[ n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_{n,m}(x) = 0 \quad (15)$$

Assioidut Legendren polynomit voidaan määritellä suoraan myös kaavalla

$$P_{n,m}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} (P_n(x)) \quad (16)$$

tai rekursiokaavalla

$$(n-m+1)P_{n+1,m}(x) = (2n+1)xP_{n,m}(x) - (n+m)P_{n-1,m}(x) \quad (17)$$

**Lause 4.** *Kun  $x = \cos \theta$ , niin assosioitu Legendren polynomi on*

$$P_{n,m}(\cos \theta) = (-1)^m (\sin \theta)^m \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (P_n(\cos \theta)), \quad (18)$$

missä  $P_n(\cos \theta)$  on tavallinen Legendren polynomi. [4]

*Todistus.*

$$\begin{aligned} P_{n,m}(\cos \theta) &= (-1)^m (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (P_n(\cos \theta)) \\ &= (-1)^m (\sin \theta)^m \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (P_n(\cos \theta)), \end{aligned}$$

sillä  $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ . □

*Huomautus 2.*  $P_{n,0}(x) = P_n(x)$ . [9]

*Todistus.*  $P_{n,0} = (-1)^0 (1-x^2)^0 \frac{d^0}{dx^0} (P_n(x)) = P_n(x)$ . □

*Huomautus 3.* Kun  $m$  on pariton,  $P_{n,m}(x)$  ei ole polynomi. [9]

*Huomautus 4.*  $P_{n,m}(x) = 0$ , kun  $m > n$ . [9]

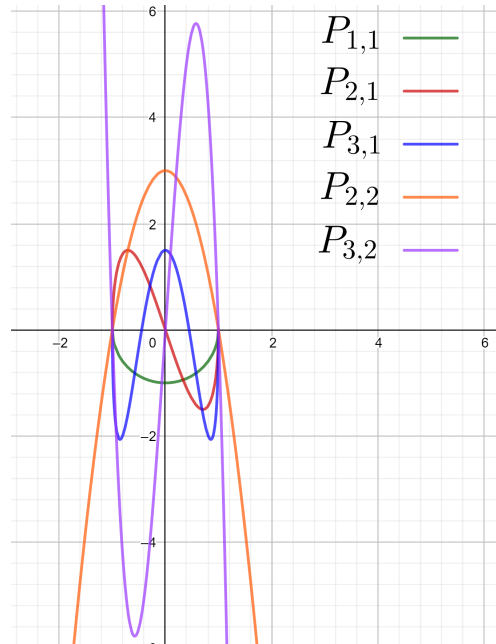
*Todistus.* Nyt  $P_{n,m}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} (P_n(x))$ .

$P_n$  on astetta  $n$  oleva polynomi ja  $n < m$ , joten  $P_n$ :n  $m$ :nnes derivaatta  $P_n^{(m)} = 0$ . Tällöin  $P_{n,m}(x) = 0$ . □

Taulukossa 2 on esitetty assosioitua Legendren funktiota kertaluvuilla 1 ja 2 ja kuvassa 6 niiden kuvaajat.

Taulukko 2: Assosioitujen Legendren funktiota.

$n$	$m$	$P_{n,m}(x)$
0	1	0
1	1	$-(1-x^2)^{1/2}$
2	1	$-3x(1-x^2)^{1/2}$
3	1	$-\frac{3}{2}(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2}$
0	2	0
1	2	0
2	2	$3(1-x^2)$
3	2	$15x(1-x^2)$



Kuva 6: Assioitujen Legendren funktioiden kuvaajia.

**Lause 5.** *Assosioidut Legendren polynomit ovat ortogonaalisia, sillä*

$$\int_{-1}^1 P_{k,m} P_{l,m} dx = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)} \delta_{kl}, \quad (19)$$

missä  $\delta_{kl}$  on Kroneckerin delta. [10]

**Määritelmä 14.** *Normalisoitu ja assosioitu Legendren polynomi*, kun  $x = \cos \theta$ , on

$$\bar{P}_{n,m}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_{n,m}(\cos \theta). \quad (20)$$

Normalisointikerroin on

$$\sqrt{\frac{2n+1}{2\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}}$$

ja tämä on huomioitu yhtälössä (20). [4]

**Lause 6.** *Kun normalisointi huomioidaan, niin [4]*

$$\int_{-1}^1 [\bar{P}_{n,m}(x)]^2 dx = 1 \quad (21)$$

**Esimerkki 1.** Osoita, että  $\int_{-1}^1 [\bar{P}_{2,1}(x)]^2 dx = 1$ , kun  $x = \cos \theta$ .

*Ratkaisu.*

Nyt  $P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$ .

Yhtälöstä (18) saadaan, että  $P_{2,1}(\cos \theta) = 3 \sin \theta \cos \theta$ , joten yhtälön (20) mukaan

$$\bar{P}_{2,1}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{15}{4}} \sin \theta \cos \theta.$$

Nyt

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [\bar{P}_{2,1}(\cos \theta)]^2 d \cos \theta &= \int_{-1}^1 \left( \sqrt{\frac{15}{4}} \sin \theta \cos \theta \right)^2 d \cos \theta \\ &= \int_{-1}^1 \frac{15}{4} (1 - \cos^2 \theta) \cos^2 \theta d \cos \theta \\ &= \frac{15}{4} \int_{-1}^1 (\cos^2 \theta - \cos^4 \theta) d \cos \theta \\ &= \frac{15}{4} \int_{-1}^1 \left( \frac{\cos^3 \theta}{3} - \frac{\cos^5 \theta}{5} \right) \\ &= \frac{15}{4} \left( \frac{1}{3} (1^3 - (-1)^3) - \frac{1}{5} (1^5 - (-1)^5) \right) \\ &= \frac{15}{4} \left( \frac{10}{15} - \frac{6}{15} \right) \\ &= 1 \end{aligned}$$



### 3.4 Schmidtin assosioidut ortogonaaliset Legendren polynomit

Tässä kappaleessa esitetään Schmidtin assosioidut ortogonaaliset Legendren polynomit sekä yksi niiden avulla johdettu tulos. Tämä tulos mahdollistaa matemaattisten ongelmien käsittelyn pallokoordinaateissa.

**Määritelmä 15.** *Schmidtin ortogonaaliset Legendren polynomit  $P_n^m$  ovat assosioitujen Legendren polynomien numeerisia kerrannaisia.*

$$P_n^m(\theta) = P_{n,m}(\theta), \quad \textbf{kun } m = 0 \quad (22)$$

$$P_n^m(\theta) = \sqrt{2 \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_{n,m}(\theta), \quad \textbf{kun } m > 0 \quad (23)$$

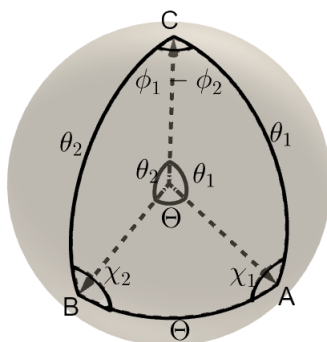
[11], [12]

*Huomautus 5.* Schmidtin ortogonaalisten Legendren polynomien avulla johdetut tulokset huomioivat vaihekertoimen  $(-1)^m$ , vaikka tätä ei olisikaan Legendren polynomien assosioinnissa otettu huomioon. [12]

**Lause 7.** *Schmidtin ortogonaalisille ja assosioiduille Legendren polynomeille pätee*

$$P_n(\cos \Theta) = \sum_{m=0}^n P_n^m(\cos \theta_1) P_n^m(\cos \theta_2) \cos(m(\phi_1 - \phi_2)), \quad (24)$$

missä  $\theta_1$  ja  $\phi_1$  kuvaavat pallopinnalla olevan pisteen  $A$  leveyttä ja itäistä pituutta. Vastaavasti  $\theta_2$  ja  $\phi_2$  ovat vastaavat suureet pisteelle  $B$ . Kulma  $\Theta$  kuvaa isoympyrän kaaren pituutta kahden pisteen  $A(\theta_1, \phi_1)$  ja  $B(\theta_2, \phi_2)$  välillä. [11], [13]



Kuva 7: Pallokolmio.

Summakaava voidaan esittää myös muodossa

$$\begin{aligned}
& \sum_{m=0}^n P_n^m(\cos \theta_1) P_n^m(\cos \theta_2) \cos(m(\phi_1 - \phi_2)) \\
&= \sum_{m=-n}^n P_{n,m}^*(\cos \theta_1) P_{n,m}^*(\cos \theta_2) e^{-im(\phi_1 - \phi_2)} \\
&= \sum_{m=-n}^n \overline{Y_n^m(\theta_1, \phi_1)} Y_n^m(\theta_2, \phi_1) \tag{25}
\end{aligned}$$

missä

$$P_{n,m}^*(\mu) = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} (1-\mu^2)^{m/2} \left( \frac{d}{d\mu} \right) (\mu^2 - 1)^n$$

ja

$$Y_n^m(\theta, \phi) = P_{n,m}^*(\cos \theta) e^{im\phi}$$

on normalisoitu palloharmoninen funktio. [13]

## 4 Laplacen yhtälön ratkaisu pallokoordinaatistossa

**Määritelmä 16.** Pallopinnalla olevat pisteet voidaan ilmoittaa *napakoordinaateilla* seuraavasti:

$$x = r \sin \theta \cos \phi,$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

ja

$$z = r \cos \theta,$$

missä  $0 \leq \theta < \pi$ ,  $0 \leq \phi < 2\pi$  ja  $r > 0$ . (kts. kuva 1) [14]

**Määritelmä 17.** Laplacen yhtälö karteesisessa koordinaatistossa on

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \quad (26)$$

ja pallokoordinaatistossa

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} = 0 \quad (27)$$

[14], [16].

Ratkaistaan yhtälö (27). Tarkastellaan homogeenista harmonista funktiota  $f(r, \theta, \phi) = r^k g(\theta, \phi)$  avaruudessa  $\mathbb{R}^3$ , mikä on ratkaisu Laplacen yhtälölle  $\nabla^2 f = 0$ . Nyt

$$\begin{aligned} \nabla^2 f &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial r^k g}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^2} r^k g \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (k r^{k+1} g) + r^{k-2} \Delta_{S^2} g \\ &= r^{k-2} k(k+1)g + r^{k-2} \Delta_{S^2} g \\ &= r^{k-2} (k(k+1)g + \Delta_{S^2} g), \end{aligned}$$

missä

$$\Delta_{S^2} g = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 g}{\partial \phi^2}.$$

Nyt  $\nabla^2 f = 0$ , jos ja vain jos  $\Delta_{S^2} g = -k(k+1)g$

Etsitään ratkaisua separoimalla. Asetetaan  $g(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi)$ . Tällöin saadaan

$$\frac{\Phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -k(k+1)\Theta\Phi \quad (28)$$

Jaetaan yhtälö (28)  $\Theta\Phi$ :llä ja kerrotaan  $\sin^2 \theta$ :lla. Tällöin

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + k(k+1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2}$$

Koska  $\Theta$  ja  $\Phi$  ovat itsenäisiä funktioita, yllä oleva on mahdollista jos ja vain jos molemmat puolet ovat yhtäsuuria vakioita  $\mu$ . Tästä saadaan, että

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \mu \Phi = 0 \quad (29)$$

ja

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + k(k+1) \sin^2 \theta - \mu = 0 \quad (30)$$

Tarkastellaan ensin yhtälöä (29). Nyt, kun huomioidaan, että  $\Phi(\phi+2\pi) = \Phi(\phi)$ , niin saadaan, että  $\mu = m^2$ , missä  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  [14]

Nyt yhtälön

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + m^2 \Phi = 0$$

ratkaisut ovat jakautuneet kahdelle funktiolle  $\Phi(\phi) = \cos m\phi$  ja  $\Phi(\phi) = \sin m\phi$ , sillä  $\Phi(\phi) = e^{im\phi}$ . [14], [6]

Ratkaistaan vielä yhtälö (30). Nyt

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + (k(k+1) \sin^2 \theta - m^2) \Theta = 0,$$

mikä on ekvivalentti yhtälön

$$\sin^2 \theta \Theta'' + \sin \theta \cos \theta \Theta' + (k(k+1) \sin^2 \theta - m^2) \Theta = 0 \quad (31)$$

kanssa. Tämä on Legendren polynomien differentiaaliyhtälöiden muunnos. Tätä varten tehdään muuttujien vaihtot  $t = \cos \theta$  ja  $u(\cos \theta) = \Theta(\theta)$  (huom!  $0 \leq \theta < \pi$ ). Tällöin yhtälö (31) saadaan muotoon

$$(1-t^2)u'' - 2tu' + \left(k(k+1) - \frac{m^2}{1-t^2}\right)u = 0 \quad (32)$$

mikä on assosioitujen Legendren polynomien yhtälö, ja minkä ratkaisut  $P_{k,m}$  saadaan yhtälöstä (16). Sijoituksella  $u(t) = (1-t^2)^{m/2}v(t)$  yhtälö (32) saadaan muotoon

$$(1-t^2)v'' - 2(m+1)tv' + (k(k+1) - m(m-1))v = 0.$$

Kun  $m = 0$ , niin yhtälö saadaan muotoon

$$(1-t^2)v'' - 2tv' + k(k+1)v = 0 \quad (33)$$

mikä on Legendren polynomien differentiaaliyhtälö. Yhtälöllä (33) on kahdentyypisiä ratkaisuja  $Q_k(t)$  ja  $P_k(t)$ , joista vain  $P_k(t)$ :t ovat polynomeja ja voidaan ratkaista yhtälöstä (13). [14]

## 5 Fysiikan ja Legendren polynomien yhteys

### 5.1 De Broglien hypoteesi

Einsteinin valon kvanttiteorian mukaan sähkömagneettisen säteilyn energia on lokalisoitunut fotoneiksi, joiden energia on  $hf$ , missä  $h$  on Planckin vakio ja  $f$  taajuus. Kuten fotoneilla, niin myös massallisilla hiukkasilla (esim. elektroneilla) on sekä aalto- että hiukkasluonnetta. De Broglien hypoteesin mukaan sekä hiukkasten että aaltojen aallonpituus on  $\lambda = h/p$ , missä  $p$  hiukkasen liikemäärä. Tämä on aalto-hiukkasdualismin seuraus, jolloin tietyt sähkömagneettiseen säteilyyn ja hiukkasiin liittyvät ilmiöt voidaan selittää joko aalto- tai hiukkasluonteella. Esimerkiksi sähkömagneettisen säteilyn hiukkasluonteen avulla voidaan selittää valosähköinen ilmiö. [15]

### 5.2 Aaltofunktio

Hiukkasten de Broglie-aaltojen kuvaamiseen käytetään aaltofunktiota  $\psi$  [15]. Esimerkiksi x-akselin suuntaan etenevän aallon yleinen aaltofunktio on  $\psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$ , missä  $A$  on aallon amplitudi, aaltoluku  $k = 2\pi/\lambda$ , kulmataajuus  $\omega = 2\pi f$  ja  $t$  on aika. [15]. Koska aaltofunktion amplitudi voi saada sekä positiivisia että negatiivisia arvoja, ei se toimi sellaisenaan kuvaamaan hiukkasen paikan todennäköisyyttä, vaan todennäköisyys löytää hiukkanen, jota kuvaa aaltofunktio  $\psi$ , paikasta  $(x, y, z)$  ajanhetkellä  $t$ , on verrannollinen aaltofunktion neliöön  $|\psi|^2$  [6]. Itseasiassa  $|\psi(x, t)|^2$  kuvaa todennäköisyyshyhtä, jolloin todennäköisyys löytää hiukkanen pieneltä väliltä  $[x, x + dx]$  on  $|\psi(x, t)|^2 dx$  [6].

Hiukkasten aaltofunktiot saadaan Schrödingerin yhtälön ratkaisuina, ja ne ovat kompleksiarvoisia funktioita, kuten aiemmin esitettiin jo x-akselin suuntaan etenevälle aallolle [15]. Schrödingerin yhtälö antaa useita eri ratkaisuja tietyille  $x$ :n ja  $t$ :n arvoille, mutta nämä kaikki ratkaisut kuvaavat samaa fysikaalista tilaa. Voidaan siis valita yksi aaltofunktio  $\psi(x, t)$  edustamaan fysikaalisesti ekvivalentteja tiloja [6]. Kun hiukkaseen liittyvä aaltofunktio tiedetään, hiukkaseen liittyvät suureet voidaan laskea odotusarvoina [6].

Hiukkasen paikka on suure, jolla ei ole fysikaalista sisältöä ennen kuin se mitataan. Mittaustuloksen mahdolliset arvot noudattavat aaltofunktion itseisarvon neliön määräämää todennäköisyysjakaumaa  $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ . Jotta tämä statistinen tulkinta olisi voimassa, täytyy hiukkasen löytyä varmuudella jostain päin avaruutta. Eli täytyy siis olla, että

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

Tätä kutsutaan aaltofunktion normalisoinniksi. Kun aaltofunktio ratkaistaan Schrödingerin yhtälöstä, niin aaltofunktion normalisaatio säilyy. [6]

Normitetun todennäköisyystiheysfunktion avulla voidaan laskea todennäköisyys hiukkasen löytymiselle väliltä  $[x_1, x_2]$  integraalista

$$p_{x_1, x_2} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx.$$

[6]

### 5.3 Kolmiulotteista kvanttimekaniikkaa

Kun siirrytään yksiulotteisesta kvanttimekaniikasta useampiulotteiseen, niin teoria on usein suoraviivainen yleistys yksiulotteisesta [6].

Nyt normalisointiehto on

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d^3r = 1,$$

missä  $d^3r = dx dy dz$ . Tilavuuselementti pallokoordinaateissa on  $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ , joten normalisointiyhtälö saadaan muotoon

$$\int |\psi|^2 d^3r = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y_l^{m_l}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_l^{m_l}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1,$$

missä  $R$  on radiaaliosan normalisoitu aaltofunktio ja  $Y_l^{m_l}$  kulmaosan normalisoitu aaltofunktio, joka on muotoa

$$Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2n+1)}{4\pi} \frac{(n-|m_l|)!}{(n+|m_l|)!}} (-1)^{m_l} e^{im_l \phi} P_n^{m_l}(\cos \theta),$$

missä  $\epsilon = (-1)^{m_l}$ , kun  $m_l > 0$  ja  $\epsilon = 1$  kun  $m_l \leq 0$  ja  $P_n^{m_l}$  on assosioitu Legendren polynomi. Yhtälössä  $l$  on ratakvanttiluku ja  $m_l$  magneettinen kvanttiluku. Pallofunktiot ovat myös ortogonaalisia. [6]

Aaltofunktion ratkaisuja on  $(2l+1)$  kappaletta jokaista  $l$ :n arvoa kohti. Nyt  $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ . [17]

### 5.4 Schrödingerin yhtälö vetyatomilla

Tässä kappaleessa esitetään, millainen on todennäköisyys löytää elektroni pallokuorelta vetyatomissa.

Bohrin atomimallin mukaan elektronit kiertävät ydintä tietyillä radoilla [15]. Kvanttiteoria poikkeaa Bohrin atomimallista siinä, että elektronilla ei

ole tiettyä paikkaa tai rataa vaan on olemassa ainoastaan todennäköisyys löytää elektroni tietyssä paikasta [15]. Koska elektronin liike ytimen ympärillä on kolmiulotteista, niin Schrödingerin yhtälö on muutettava pallokoordinaatistoon [15]. Tällöin Schrödingerin yhtälö on muotoa  $\nabla^2\psi = iD\frac{\partial}{\partial t}\psi + W\psi$ , missä  $D = -2m/\hbar$ ,  $W = (2m/\hbar^2)V(x)$  ja  $V(x)$  hiukkasen kokema ulkoinen potentiaali [15], [16].

Nyt vetyatomin aaltofunktio voidaan esittää kolmen yhtälön avulla, joista jokainen riippuu vain yhdestä muuttujasta  $r$ ,  $\theta$  tai  $\phi$  (kts. kuva 1). Tällöin vetyatomin aaltofunktio on

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Funktio  $R(r)$  kuvaa, kuinka aaltofunktio  $\psi$  vaihtelee  $r$ :n (etäisyys ytimeä) mukaan, kun  $\theta$  ja  $\phi$  ovat vakioita. Funktio  $\Theta(\theta)$  kuvaa, kuinka aaltofunktio  $\psi$  vaihtelee, kun  $r$  ja  $\phi$  ovat vakioita. Vastaavasti funktio  $\Phi(\phi)$  kuvaa, kuinka aaltofunktio  $\psi$  vaihtelee, kun  $r$  ja  $\theta$  ovat vakioita. Nyt Schrödingerin yhtälö voidaan esittää kolmena erillisenä yhtälönä  $r$ :n,  $\theta$ :n ja  $\phi$ :n funktioina: [15]

$$\Phi - \text{yhtälö} : \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0,$$

$$\Theta - \text{yhtälö} : \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta = 0$$

ja

$$R - \text{yhtälö} : \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Kun  $m_l = 0$  kulmaosien ratkaisufunktiot ovat Legendren polynomeja  $P_l(z)$ , missä  $l = 0, 1, 2, \dots$ . Kun  $m_l \neq 0$ , niin ratkaisufunktiot ovat assioituja Legendren funktioita  $P_{l,m}(z)$ , missä  $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ . Radiaaliosan ratkaisufunktio ratkaiseminen muistuttaa yksidimensionaalisen Schrödingerin yhtälön ratkaisua. [17]

Nyt vetyatomin todennäköisyystiheys on

$$|\psi|^2 = |R|^2|\Theta|^2|\Phi|^2$$

ja todennäköisyys löytää elektroni tilavuusalkiosta  $dV$  on

$$P(V) = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi.$$

[15]

Edellä esitetystä seuraa, että elektroni voi asettua vetyatomin ytimen ympärille stationäärisille (sidotuille) tiloille, jolloin sen aaltofunktio ja energia ovat

$$\psi = R_{nl} \Theta_{lm_l} \Phi_{m_l}$$

ja

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} \right) = \frac{E_1}{n^2},$$

missä  $\epsilon_0$  tyhjiön permittiivisyys,  $\hbar$  Diracin vakio ja  $n$  pääkvanttiluku ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Sivukvanttiluku  $l$  ja magneettinen kvanttiluku  $m_l$  määräävät, millä orbitaalilla elektroni on ja ne voivat saada arvoja  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$  ja  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . [15]

Sivukvanttiluku kuvaa yhdessä magneettisen kvanttiluvun kanssa atomiorbitaalin muotoa. Magneettinen kvanttiluku kuvaa elektronin avaruudellisen sijainnin lisäksi elektronin energiaa magneettikentässä. Atomiorbitaalit, joilla on sama pää- ja sivukvanttiluku muodostavat elektronikuoren alakuoren. Magneettisen magneettiluvun perusteella määräytyy, kuinka monta orbitaalia näillä alakuorilla on. [15]



## 6 Fotoelektronien kulmajakaumat spektrometriassa

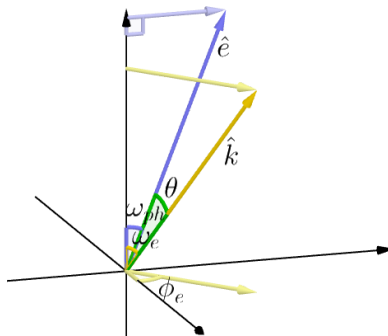
Fotoionisaatiossa elektronien kulmajakauma noudattaa yhtälöä

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lin,pol} = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 + \beta P_2(\cos\theta)\right) \quad (34)$$

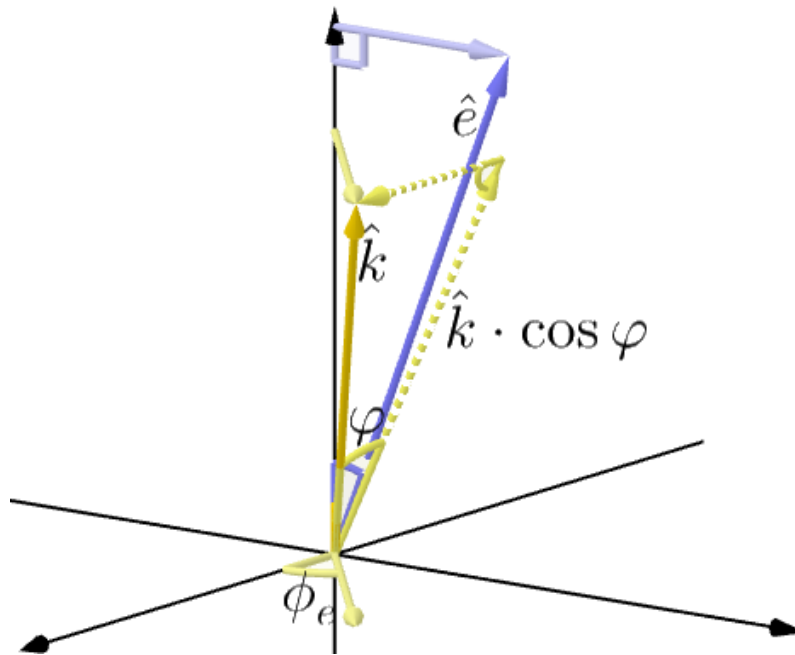
kun valon aallonpituus on paljon suurempi kuin atomin koko (sähkömagneettinen kenttä vaikuttaa tasaisesti koko atomin yli.) ja valo on täydellisesti lineaarisesti polarisoitunutta. Yhtälössä  $(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{lin,pol}$  on differentiaalinen vaikutusala,  $\theta$  sähkömagneettisen säteilyn polarisaatiovektorin ja elektronin nopeusvektorin välinen kulma ja  $\beta$  kulmajakaumaparametri (anisotropiaparametri), joka voi saada arvoja väliltä  $[-1, 2]$ . Kulmajakaumaparametri  $\beta$  riippuu ionisoitavien orbitaalien muodosta, joka puolestaan riippuu kvanttiluvuista  $l$  ja  $m_l$ . Esimerkiksi, jos elektroneja ionisoidaan s-orbitaalilta, niin syntyvät aallot (p-aalto) ovat ainakin osittain erilaisia kuin ionisaatiossa p-orbitaalilta (s-, p- ja d-aallot). Tällöin fotoelektronien kulmajakaumat ovat erilaiset ja kulmajakaumaparametrit erisuuret. [18]

Fotoionisaatiomittaukset suoritetaan puolipallolanalyysaattorilla, jossa detektori ei havaitse vain yhteen kulmaan  $\theta$  tulevia elektroneja, vaan detektori havaitsee elektroneja jollakin välillä  $[\theta - d\theta, \theta + d\theta]$ . Tässä tutkielmassa selvitämme, millaisen virheen tämä aiheuttaa mittauksissa saatuihin kulmaparametrin  $\beta$  arvoihin.

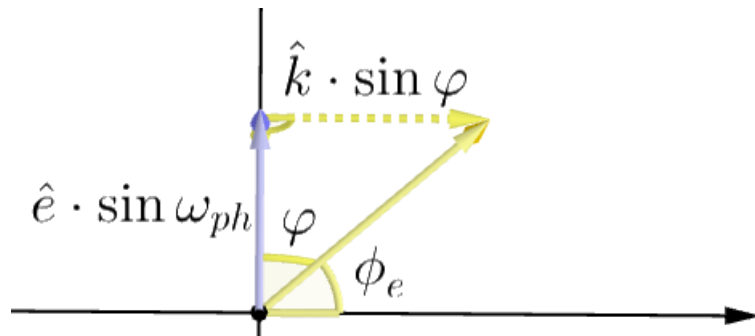
Kuvissa 8-11 on esitetty tilanne, jossa polarisaatiovektori  $\hat{e}$  ja elektronien nopeusvektori  $\hat{k}$  osoittavat kulmiin  $\omega_{ph}$ ,  $\omega_e$  ja  $\phi_e$   $x$ - ja  $z$ -akselien suhteen. Huomaa, että fotoneilla on vain polarisaatiovektori.



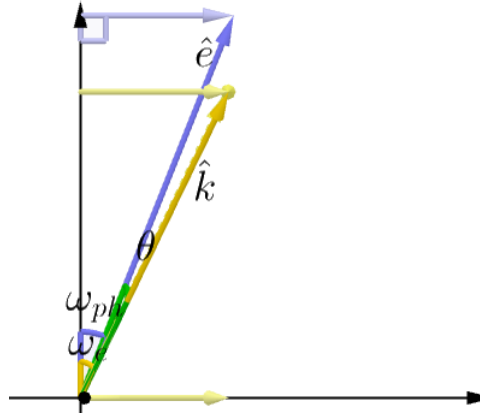
Kuva 8: Polarisaatiovektori osoittaa kulmaan  $\omega_{ph}$  ja elektronin nopeusvektori kulmiin  $\omega_e$  ja  $\phi_e$ .



Kuva 9:  $\varphi = \pi - \phi_e$ .

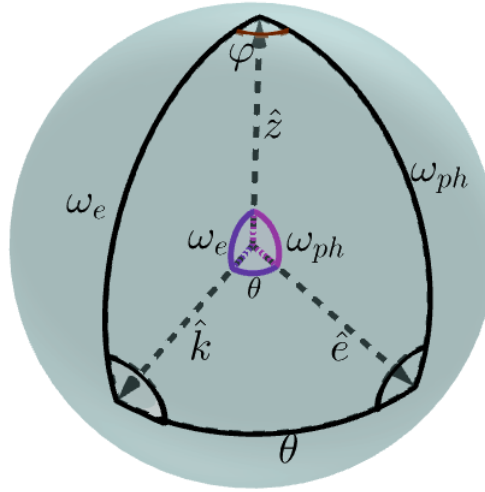


Kuva 10: Tilanne xy-tasossa.



Kuva 11: Tilanne yz-tasossa.

Koska kulman  $\theta$  arvoa ei tiedetä, on se ilmoitettava kulmia  $\omega_{ph}$ ,  $\omega_e$  ja  $\phi_e$  käyttäen. Hyödynnetään tässä pallotrigonometrian ominaisuuksia. (Kuva 12)



Kuva 12: Pallokolmio, joka muodostuu pallon keskipisteen ja vektoreiden  $\hat{z}$ ,  $\hat{e}$  ja  $\hat{k}$  muodostamien tasojen ja pallon pinnan leikkauksena syntyvistä pallon isoympyröiden kaarista.

Pallotrigonometrian mukaan

$$\cos \theta = \cos \omega_e \cdot \cos \omega_{ph} + \sin \omega_e \cdot \sin \omega_{ph} \cdot \cos \varphi \quad (35)$$

missä  $\varphi = \pi - \phi_e$ .

## 6.1 Kulmaparametrin lausekkeen johto käyttäen Schmidtin assosioitujen Legendren polynomien summausta

Fotoionisaation differentiaalinen vaikutusala voitiin ilmoittaa Legendren polynomien avulla seuraavasti

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lin,pol} = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 + \beta P_2(\cos \theta)\right)$$

Nyt Schmidtin assosioitujen Legendren polynomien laskusääntöjen mukaan

$$\begin{aligned} P_2(\cos \theta) &= \sum_{m=0}^2 P_2^m(\cos \omega_e) \cdot P_2^m(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(m\varphi) \\ &= P_2^0(\cos \omega_e) \cdot P_2^0(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(0) + P_2^1(\cos \omega_e) \cdot P_2^1(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(\varphi) \\ &\quad + P_2^2(\cos \omega_e) \cdot P_2^2(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(2\varphi) \end{aligned}$$

Assosioidut Legendren polynomit saadaan yhtälöstä (16) eli

$$P_{n,m}(\cos \theta) = (-1)^m \sin^m \theta \cdot \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (P_n(\cos \theta))$$

joten

$$P_{2,m}(\cos \theta) = (-1)^2 \sin^m \theta \cdot \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (P_2(\cos \theta)) = \frac{1}{2} \sin^m \theta \cdot \frac{d^m}{d \cos^m \theta} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

sillä  $P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$ .

Tällöin

$$P_{2,0}(\cos \omega_e) = \frac{1}{2} \sin^0 \omega_e \cdot \frac{d^0}{d \cos^0 \omega_e} (3 \cos \omega_e - 1) = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \omega_e - 1),$$

$$P_{2,1}(\cos \omega_e) = \frac{1}{2} \sin \omega_e \cdot \frac{d}{d \cos \omega_e} (3 \cos^2 \omega_e - 1) = \frac{1}{2} \sin \omega_e \cdot 6 \cos \omega_e = 3 \sin \omega_e \cos \omega_e,$$

ja

$$P_{2,2}(\cos \omega_e) = \frac{1}{2} \sin^2 \omega_e \cdot \frac{d^2}{d \cos^2 \omega_e} (3 \cos^2 \omega_e - 1) = \frac{1}{2} \sin^2 \omega_e \cdot \frac{d}{d \cos \omega_e} 6 \cos \omega_e = 3 \sin^2 \omega_e$$

ja vastaavasti  $P_{2,0}(\cos^2 \omega_{ph}) = \frac{1}{2}(3 \cos \omega_{ph} - 1)$ ,  $P_{2,1}(\cos \omega_{ph}) = 3 \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph}$

ja  $P_{2,2}(\cos \omega_{ph}) = 3 \sin^2 \omega_{ph}$ .

Nyt Schmidtin assosioituneet Legendren polynomit saadaan yhtälöitä (22) ja (23) käyttämällä.

$$P_2^0(\cos \omega_e) = P_{2,0}(\cos \omega_e),$$

$$P_2^1(\cos \omega_e) = \sqrt{2 \frac{(2-1)!}{(2+1)!}} \cdot 3 \sin \omega_e \cos \omega_e = \sqrt{3} \sin \omega_e \cos \omega_e$$

ja

$$P_2^2(\cos \omega_e) = \sqrt{2 \frac{(2-2)!}{(2+2)!}} \cdot 3 \sin^2 \omega_e = \sqrt{\frac{3}{4}} \sin^2 \omega_e$$

ja vastaavasti  $P_2^0(\cos \phi_e) = P_{2,0}(\cos \phi_e)$ ,  $P_2^1(\cos \phi_e) = \sqrt{3} \sin \phi_e \cos \phi_e$  ja  $P_2^2(\cos \phi_e) = \sqrt{\frac{3}{4}} \sin^2 \phi_e$ .

Nyt  $P_2(\cos \theta)$  voidaan ilmoittaa tunnettujen kulmien avulla seuraavasti

$$\begin{aligned} P_2(\cos \theta) &= \sum_{m=0}^2 P_2^m(\cos \omega_e) \cdot P_2^m(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(m\varphi) \\ &= P_2^0(\cos \omega_e) \cdot P_2^0(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(0) + P_2^1(\cos \omega_e) \cdot P_2^1(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(\varphi) \\ &\quad + P_2^2(\cos \omega_e) \cdot P_2^2(\cos \omega_{ph}) \cdot \cos(2\varphi) \\ &= \frac{1}{2}(3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot \frac{1}{2}(3 \cos^2 \omega_{ph} - 1) \cdot 1 + \sqrt{3} \sin \omega_e \cos \omega_e \\ &\quad \cdot \sqrt{3} \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos \varphi + \sqrt{\frac{3}{4}} \sin^2 \omega_e \cdot \sqrt{\frac{3}{4}} \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2\varphi) \\ &= \frac{1}{2}(3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) + 3 \sin \omega_e \cos \omega_e \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos \varphi \\ &\quad + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2\varphi) \end{aligned}$$

Nyt fotoionisaation differentiaalin vaikutusala on siis

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{lin,pol} &= \frac{\sigma}{4\pi} \left( 1 + \beta P_2(\cos \theta) \right) \\ &= \frac{\sigma}{4\pi} \left[ 1 + \beta \left( \frac{1}{2}(3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) + 3 \sin \omega_e \cos \omega_e \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos \varphi \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2\varphi) \right) \right] \end{aligned}$$

Tässä differentiaalisen vaikutusalan yhtälössä  $\omega_{ph}$  on diskreetti ( $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$  **tai**  $54, 74^\circ$ ), mutta  $\omega_e$  ja  $\varphi = \pi - \phi_e$  eivät ole. Integroidaan differentiaalinen vaikutusala kulma-aukeamien  $\omega_{e,1} \rightarrow \omega_{e,2}$  ja  $\phi_{e,1} \rightarrow \phi_{e,2}$  yli. Koska differentiaalinen avaruuskulma  $d\Omega = \sin \omega_e d\omega_e d\phi_e$  ja

$$d\sigma = \frac{\sigma}{4\pi} \left[ 1 + \beta \left( \frac{1}{2} (3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) + 3 \sin \omega_e \cos \omega_e \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos \varphi \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2\varphi) \right) \right] d\Omega,$$

niin

$$\begin{aligned} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} d\sigma &= \int_{\Omega_1}^{\Omega_2} \frac{\sigma}{4\pi} \left[ 1 + \beta \left( \frac{1}{2} (3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) + 3 \sin \omega_e \cos \omega_e \sin \omega_{ph} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cdot \cos \omega_{ph} \cos \varphi + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2\varphi) \right) \right] d\Omega \\ \int_{\sigma_{e,1}}^{\sigma_{e,2}} \sigma &= \frac{\sigma}{4\pi} \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left[ 1 + \beta \left( \frac{1}{2} (3 \cos^2 \omega_e - 1) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) + 3 \sin \omega_e \cos \omega_e \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cdot \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos(\pi - \phi_e) + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cdot \cos(2(\pi - \phi_e)) \right) \right] \\ &\quad \cdot \sin \omega_e d\omega_e d\phi_e \\ \frac{4\pi}{\sigma} (\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left[ \sin \omega_e + \beta \left( \frac{1}{2} (3 \cos^2 \omega_e \sin \omega_e - \sin \omega_e) \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 3 \sin^2 \omega_e \cos \omega_e \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cdot \cos(\pi - \phi_e) + \frac{3}{4} \sin^3 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cdot \cos(2(\pi - \phi_e)) \right) \right] d\omega_e d\phi_e \\ \frac{4\pi}{\sigma} (\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left\{ -\cos \omega_e + \beta \left( \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph}) (3(-\frac{1}{3} \cos^3 \omega_e) + \cos \omega_e) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 3 \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) \cdot \frac{1}{3} \sin^3 \omega_e + \frac{3}{4} \sin^2 \omega_{ph} \cos(2(\pi - \phi_e)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \cdot \frac{1}{12} (\cos(3\omega_e) - 9 \cos \omega_e) \right) \right\} d\phi_e \\ \frac{4\pi}{\sigma} (\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \left\{ \cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2} + \beta \left( \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph}) (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) + \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) \cdot (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin \omega_{e,1}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cos(2(\pi - \phi_e)) \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 9 \cos \omega_{e,1}) \right) \right\} d\phi_e \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) = & \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \left\{ (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2})\phi_e + \beta \left( \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph})(\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} \right. \right. \\
& + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1})\phi_e + \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin \omega_{e,1}) \cdot (-\sin \phi_e) \\
& + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} \\
& \left. \left. + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot \sin \phi_e \cos \phi_e \right) \right] \\
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) = & \left\{ (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2})(\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \beta \left( \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph})(\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} \right. \right. \\
& + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1})(\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) - \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin \omega_{e,1}) \\
& \cdot (\sin \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} \\
& \left. \left. + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1}) \right) \right]
\end{aligned}$$

Merkitään

$$a = (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2})(\phi_{e,2} - \phi_{e,1})$$

ja

$$\begin{aligned}
b = & \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph})(\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} \\
& + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1})(\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) - \sin \omega_{ph} \cos \omega_{ph} (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin \omega_{e,1}) \\
& \cdot (\sin \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} \\
& + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1})
\end{aligned}$$

Lisäksi merkitään, että

$$p = (\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1})/\sigma,$$

mikä kuvaa todennäköisyyttä, jolla elektroni havaitaan kyseisellä detektorin geometrialla. Tällöin

$$4\pi \cdot p = a + \beta \cdot b$$

eli

$$\beta = \frac{4\pi \cdot p - a}{b} \quad (36)$$

## 6.2 Kulmaparametrin lausekkeen johto käyttäen neliöön korotusta

Pallotrigonometrian mukaan

$$\cos \theta = \cos \omega_e \cdot \cos \omega_{ph} + \sin \omega_e \cdot \sin \omega_{ph} \cdot \cos \varphi,$$

missä  $\varphi = \pi - \phi_e$ . Tällöin

$$\begin{aligned} \cos^2 \theta &= (\cos \omega_e \cdot \cos \omega_{ph} + \sin \omega_e \cdot \sin \omega_{ph} \cdot \cos \varphi)^2 \\ &= \cos^2 \omega_e \cos^2 \omega_{ph} + 2 \cos \omega_e \cos \omega_{ph} \sin \omega_e \sin \omega_{ph} \cos \varphi + \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cos^2 \varphi \end{aligned}$$

Fotoionisaation differentiaalin vaikutusala voidaan muokata Legendren polynomin avulla seuraavasti

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{lin, pol} &= \frac{\sigma}{4\pi} \left( 1 + \beta P_2(\cos \theta) \right) \\ &= \frac{\sigma}{4\pi} \left( 1 + \beta \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \frac{\sigma}{4\pi} \left( 1 + \frac{\beta}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \right). \end{aligned}$$

Koska differentiaalin avaruuskulma  $d\Omega = \sin \omega_e d\omega_e d\phi_e$ , niin

$$\begin{aligned} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} d\sigma &= \int_{\Omega_1}^{\Omega_2} \frac{\sigma}{4\pi} \left\{ 1 + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( \cos^2 \omega_e \cos^2 \omega_{ph} + 2 \cos \omega_e \cos \omega_{ph} \sin \omega_e \sin \omega_{ph} \right. \right. \right. \\ &\quad \cdot \cos(\pi - \phi_e) + \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cos^2(\pi - \phi_e) \left. \left. \right) - 1 \right] \left. \right\} d\Omega \\ \int_{\sigma_{e,1}}^{\sigma_{e,2}} \sigma &= \frac{\sigma}{4\pi} \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left\{ 1 + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( \cos^2 \omega_e \cos^2 \omega_{ph} + 2 \cos \omega_e \cos \omega_{ph} \sin \omega_e \right. \right. \right. \\ &\quad \cdot \sin \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) + \sin^2 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cos^2(\pi - \phi_e) \left. \left. \right) - 1 \right] \left. \right\} \sin \omega_e d\omega_e d\phi_e \\ \int_{\sigma_{e,1}}^{\sigma_{e,2}} \sigma &= \frac{\sigma}{4\pi} \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left\{ \sin \omega_e + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( \cos^2 \omega_e \sin \omega_e \cos^2 \omega_{ph} + 2 \cos \omega_e \sin^2 \omega_e \cos \omega_{ph} \right. \right. \right. \\ &\quad \cdot \sin \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) + \sin^3 \omega_e \sin^2 \omega_{ph} \cos^2(\pi - \phi_e) \left. \left. \right) - \sin \omega_e \right] \left. \right\} d\omega_e d\phi_e \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \int_{\omega_{e,1}}^{\omega_{e,2}} \left\{ -\cos \omega_e + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( \cos^2 \omega_{ph} \cdot \left( -\frac{1}{3} \cos^3 \omega_e \right) + 2 \cos \omega_{ph} \right. \right. \right. \\
&\quad \cdot \sin \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) \cdot \left( \frac{1}{3} \sin^3 \omega_e \right) + \sin^2 \omega_{ph} \cos^2(\pi - \phi_e) \\
&\quad \cdot \left( \frac{1}{12} (\cos(3\omega_e) - 9 \cos \omega_e) \right) + \cos \omega_e \left. \right] \Big\} d\phi_e \\
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \left\{ \cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2} + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( -\frac{1}{3} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,2} - \cos^3 \omega_{e,1}) \right. \right. \right. \\
&\quad + \frac{2}{3} \cos \omega_{ph} \sin \omega_{ph} \cos(\pi - \phi_e) \cdot (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin^3 \omega_{e,1}) \\
&\quad + \frac{1}{12} \sin^2 \omega_{ph} \cos^2(\pi - \phi_e) \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} \\
&\quad + 9 \cos \omega_{e,1}) \Big) + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1} \left. \right] \Big\} d\phi_e \\
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= \int_{\phi_{e,1}}^{\phi_{e,2}} \left\{ (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2}) \phi_e + \frac{\beta}{2} \left[ 3 \left( -\frac{1}{3} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,2} - \cos^3 \omega_{e,1}) \phi_e \right. \right. \right. \\
&\quad + \frac{2}{3} \cos \omega_{ph} \cdot \sin \omega_{ph} \cdot (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin^3 \omega_{e,1}) (-\sin \phi_e) + \frac{1}{12} \sin^2 \omega_{ph} \\
&\quad \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot \frac{1}{2} (\phi_e + \sin \phi_e \cos \phi_e) \Big) \\
&\quad + (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) \phi_e \left. \right] \Big\} \\
\frac{4\pi}{\sigma}(\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}) &= (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \beta \left[ \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) \right. \\
&\quad \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) - \cos \omega_{ph} \cdot \sin \omega_{ph} \cdot (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin^3 \omega_{e,1}) (\sin \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1}) \\
&\quad + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \\
&\quad \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1} + \sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1}) \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \right]
\end{aligned}$$

Merkitään

$$a = (\cos \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1})$$

ja

$$\begin{aligned}
b' = & \beta \left[ \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \right. \\
& - \cos \omega_{ph} \cdot \sin \omega_{ph} \cdot (\sin^3 \omega_{e,2} - \sin^3 \omega_{e,1}) (\sin \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1}) \\
& + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \\
& \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1} + \sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1}) \\
& \left. + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \right]
\end{aligned}$$

Lisäksi merkitään, että

$$p = (\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1})/\sigma,$$

mikä kuvaa todennäköisyyttä, jolla elektroni havaitaan kyseisellä detektorin geometrialla. Tällöin

$$4\pi \cdot p = a + \beta \cdot b',$$

eli

$$\beta = \frac{4\pi \cdot p - a}{b'} \quad (37)$$

Osoitetaan, että yhtälöiden (36) ja (37)  $b$ :n ja  $b'$ :n arvot vastaavat toisiaan.

Nyt  $b = b'$  jos ja vain jos

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} P_2(\cos \omega_{ph}) (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \\
& \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1}) \\
= & \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) \\
& - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1} + \sin \phi_{e,2} \cos \phi_{e,2} - \sin \phi_{e,1} \cos \phi_{e,1}) \\
& + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1})
\end{aligned}$$

eli

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4} (3 \cos^{\omega}_{ph} - 1) (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2} + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \\
= & \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1}) \\
& - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}).
\end{aligned}$$

Osoitetaan tämä. Nyt

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1})) \\
& - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) \cdot (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \\
& = (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \left( \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1})) \right. \\
& \quad \left. - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) \right).
\end{aligned}$$

Käytetään nyt trigonometrian kolminkertaisen kulman kaavaa  $\cos 3x = 4 \cos^3 x - 3 \cos x$ . Tällöin

$$\begin{aligned}
& (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \left( \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (\cos(3\omega_{e,2}) - \cos(3\omega_{e,1})) \right. \\
& \quad \left. - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) \right) \\
& = (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \left( \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) + \frac{1}{16} \sin^2 \omega_{ph} \cdot (4 \cos^3 \omega_{e,2} - 3 \cos \omega_{e,2} \right. \\
& \quad \left. - 4 \cos^3 \omega_{e,1} + 3 \cos \omega_{e,1} - 9 \cos \omega_{e,2} + 9 \cos \omega_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) \right) \\
& = (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \left( \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,2}) + \frac{1}{16} (1 - \cos^2 \omega_{ph}) \cdot (4 \cos^3 \omega_{e,2} \right. \\
& \quad \left. - 4 \cos^3 \omega_{e,1} - 12 \cos \omega_{e,2} + 12 \cos \omega_{e,1}) + \frac{1}{2} (\cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}) \right) \\
& = (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) \left( \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,1} - \frac{1}{2} \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,2} + \frac{1}{4} \cos^3 \omega_{e,2} - \frac{1}{4} \cos^3 \omega_{e,1} \right. \\
& \quad \left. - \frac{3}{4} \cos \omega_{e,2} + \frac{3}{4} \cos \omega_{e,1} - \frac{1}{4} \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,2} + \frac{1}{4} \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,1} \right. \\
& \quad \left. + \frac{3}{4} \cos^2 \omega_{ph} \cos \omega_{e,2} - \frac{3}{4} \cos^2 \omega_{ph} \cos \omega_{e,1} + \frac{1}{2} \cos \omega_{e,2} - \frac{1}{2} \cos \omega_{e,1} \right) \\
& = \frac{1}{4} (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) (3 \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,1} - 3 \cos^2 \omega_{ph} \cos^3 \omega_{e,2} + 3 \cos^2 \omega_{ph} \cos \omega_{e,2} \\
& \quad - 3 \cos^2 \omega_{ph} \cos \omega_{e,1} - \cos^3 \omega_{e,1} + \cos^3 \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,2} + \cos \omega_{e,1}) \\
& = \frac{1}{4} (\phi_{e,2} - \phi_{e,1}) (3 \cos^2 \omega_{ph} - 1) (\cos^3 \omega_{e,1} - \cos \omega_{e,2} + \cos \omega_{e,2} - \cos \omega_{e,1}),
\end{aligned}$$

joten  $b = b'$ .

## 7 Tulosten tarkastelu

Oletetaan, että fotoionisaation elektronien kulmajakaumat noudattavat yhtälöä (34) eli

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lin,pol} = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 + \beta P_2(\cos \theta)\right).$$

Kun halutaan tutkia kulmajakaumaparametria  $\beta$ , fotoionisaatiospektri eli differentiaalinen vaikutusala mitataan kahdessa eri kulmassa. Kun polarisaatiovektorin ja elektronien nopeusvektorin väliset kulmat ovat  $0^\circ$  ja  $90^\circ$ , niin yhtälön (34) avulla voidaan osoittaa, että

$$\beta = \frac{2(I_0 - I_{90})}{I_0 + 2I_{90}} \quad (38)$$

missä  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  on  $I_0$  kulmassa  $0^\circ$  ja  $I_{90}$  kulmassa  $90^\circ$ . Todistetaan tämä. Nyt

$$I_0 = \frac{d\sigma}{d\Omega} \left(1 + \beta \left(\frac{3}{2} \cos^2 0^\circ - \frac{1}{2}\right)\right) = \frac{\sigma}{4\pi} (1 + \beta)$$

ja

$$I_{90} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \left(1 + \beta \left(\frac{3}{2} \cos^2 90^\circ - \frac{1}{2}\right)\right) = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 - \frac{\beta}{2}\right),$$

joten

$$\frac{\sigma}{4\pi} = \frac{I_0}{1 + \beta} = \frac{I_{90}}{1 - \beta/2}$$

ja

$$\begin{aligned} I_0(1 - \beta/2) &= I_{90}(1 + \beta) \\ \beta I_0 + 2\beta I_{90} &= 2I_0 - 2I_{90} \\ \beta &= \frac{2(I_0 - I_{90})}{I_0 + 2I_{90}} \end{aligned}$$

Muita mahdollisia kulman arvoja ovat  $45^\circ$  ja  $54,74^\circ$ , jota käytetään, kun halutaan mitata fotoelektronispektri, jossa havaittujen orbitaalien intensiteetit eivät riipu  $\beta$ -parametrasta. Tällöin

$$\beta = \frac{2(I_{45} - I_0)}{\frac{1}{2}I_0 - 2I_{54,74}} \quad (39)$$

$$\beta = \frac{2(I_{45} - I_{90})}{\frac{1}{2}I_{90} + I_{45}} \quad (40)$$

$$\beta = \frac{2(I_{54,74} - I_{45})}{yI_{45} - \frac{1}{2}I_{54,74}} \quad (41)$$

$$\beta = \frac{2(I_{54,74} - I_0)}{yI_0 - 2I_{54,74}} \quad (42)$$

ja

$$\beta = \frac{2(I_{54,74} - I_{90})}{yI_{90} + I_{54,74}} \quad (43)$$

missä  $y = 3 \cos^2(54, 74^\circ) - 1 \approx -0,0002116692$

Tutkitaan nyt, miten yhtälöt (38)-(40) toimivat, kun detektori ei havaitsekaan vain yhteen kulmaan tulevia elektroneja. Kun huomioitiin, että detektori havaitsee elektroneja kulma-aukeamalla, niin päädyttiin tulokseen

$$4\pi \cdot p = a + \beta \cdot b,$$

joten

$$p = \frac{a + \beta \cdot b}{4\pi} \quad (44)$$

Nyt yhtälöiden (38)-(43) ja (44)  $\beta$ -arvot ovat erit, sillä yhtälössä (44) on otettu huomioon, että detektori havaitsee elektroneja tietyllä alueella. Merkitään yhtälön (44) kulmaparametria  $\beta'$ :lla. Koska kulmajakaumaparametri voi saada arvoja väliltä  $[-1, 2]$ , niin nyt  $\beta' \in [-1, 2]$ .

## 7.1 Kulmaparametrin virhe, kun detektori on ympyrämäinen

Selvitetään, millainen virhe kulmajakaumaparametriin aiheutuu, kun detektori havaitsee elektroneja kulma-aukeamalla, missä  $0^\circ < \omega_e < 15^\circ$  ja  $0^\circ < \phi_e < 360^\circ$ . Tällöin siis oletetaan, että detektori olisi ympyrämäinen.

Nyt yhtälöä (36) (tai (37)) saadaan yksinkertaistettu, sillä  $\sin(0^\circ) = 0$ ,  $\sin(360^\circ) = 0$ ,  $\cos(0^\circ) = 1$  ja  $\cos(360^\circ) = 1$ . Nyt

$$4\pi \cdot p = 2\pi \cdot (1 - \cos \omega_{e,2}) + \beta' \cdot \pi \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) \cdot (\cos \omega_{e,2} - \cos^3 \omega_{e,2})$$

eli

$$p = \frac{1}{2}(1 - \cos \omega_{e,2}) + \frac{1}{4}\beta' \cdot P_2(\cos \omega_{ph}) \cdot (\cos \omega_{e,2} - \cos^3 \omega_{e,2}), \quad (45)$$

missä  $P_2(\cos \omega_{ph}) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \omega_{ph} - 1)$  ja  $p = \frac{\sigma_{e,2} - \sigma_{e,1}}{\sigma}$ .

Lasketaan ensin, millainen kulmaparametrin arvo  $\beta$  olisi, jos detektori oletettaisiin pistemäiseksi. Taulukkoon 3 on laskettu  $\beta$ :n arvot, kun mittaukset on suoritettu kahdella eri kulmalla. Esimerkiksi, kun polarisaatiovektorin ja

elektronien nopeusvektorin väliset kulmat ovat  $0^\circ$  ja  $90^\circ$ , niin  $\beta$ :n arvo saadaan yhtälöstä (38). Nyt yhtälöiden (38)-(43) intensiteetit  $I = \frac{d\sigma}{d\Omega}$  voidaan korvata todennäköisyyksillä  $p = \frac{d\sigma}{d\Omega}/\sigma$ , sillä  $\sigma$  supistuu pois laskettaessa kulmaparametrin  $\beta$  arvoja.

Lasketaan esimerkkinä kulmaparametrin  $\beta$  arvo, kun polarisaatiovektori osoittaa kulmiin  $0^\circ$  ja  $90^\circ$ . Nyt yhtälön (45) mukaan

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{1}{2}(1 - \cos 15^\circ) + \frac{1}{8}(3 \cos^2 0^\circ - 1)(\cos 15^\circ - \cos^3 15^\circ) \cdot \beta' \\ &= 0,016176119\beta' + 0,017037087 \end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned} p_{90} &= \frac{1}{2}(1 - \cos 15^\circ) + \frac{1}{8}(3 \cos^2 90^\circ - 1)(\cos 15^\circ - \cos^3 15^\circ) \cdot \beta' \\ &= -0,008088095\beta' + 0,017037087 \end{aligned}$$

Nyt yhtälön (38) mukaan

$$\beta = \frac{2(I_0 - I_{90})}{I_0 + 2I_{90}} = \frac{2(p_0 - p_{90})}{p_0 + 2p_{90}} = \frac{0,04852857\beta'}{0,051111261} \approx 0,9495\beta'$$

eli  $\beta = 0,9495\beta'$  ja esimerkiksi  $\beta = -0,9495$ , kun  $\beta' = -1$ .

Taulukko 3: Kulmaparametrin  $\beta$  arvot, kun oletetaan detektorin olevan pistemäinen,  $0 < \omega_e < 15^\circ$  ja  $0 < \phi_e < 360^\circ$ .

$\omega_{ph}$	$\beta' = -1$	$\beta' = 0$	$\beta' = 0,5$	$\beta' = 1$	$\beta' = 2$
$0^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$
$0^\circ$ ja $45^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$
$0^\circ$ ja $54,74^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$
$45^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$
$45^\circ$ ja $54,74^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$
$54,74^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9495$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4747$	$\beta = 0,9495$	$\beta = 1,8989$

Taulukon 3 tuloksista huomataan, että  $\beta$ :n arvo pienenee hieman, kun detektori oletetaan pistemäiseksi ja  $\beta' > 0$ . Vastaavasti  $\beta$ :n arvo on vähän suurempi, kun  $\beta' < 0$ . Taulukkoon 4 on laskettu  $\beta$ :n arvolle aiheutuvat virheprosentit, kun detektori oletetaan pistemäiseksi.

Taulukko 4: Kulmaparametrin  $\beta$  virheprosentti, kun detektori oletetaan pistemäiseksi,  $0 < \omega_e < 15^\circ$  ja  $0 < \phi_e < 360^\circ$ .

$\beta'$	$\beta$	Virhe $\frac{\beta-\beta'}{\beta'} \cdot 100\%$
-1	-0,9495	-5,053
0	0	0
0,5	0,4747	-5,053
1	0,9495	-5,053
2	1,8989	-5,053

Taulukon 4 tulosten perusteella voidaan todeta, että  $\beta$ :lle aiheutuu -5,053 % virhe, kun detektori oletetaan pistemäiseksi ja  $\beta \neq 0$ .

## 7.2 Kulmaparametrin virhe pienemmällä kulma-aukeamalla

Taulukkoon 5 on laskettu kulmaparametrin arvot ja Taulukkoon 6 kulmaparametrin virheprosentit kulmilla  $0 < \omega_e < 5^\circ$  ja  $0 < \phi_e < 360^\circ$ .

Taulukko 5: Kulmaparametrin  $\beta$  arvot, kun oletetaan detektorin olevan pistemäinen,  $0^\circ < \omega_e < 5^\circ$  ja  $0^\circ < \phi_e < 360^\circ$ .

$\omega_{ph}$	$\beta' = -1$	$\beta' = 0$	$\beta' = 0,5$	$\beta' = 1$	$\beta' = 2$
$0^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$
$0^\circ$ ja $45^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$
$0^\circ$ ja $54,74^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$
$45^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$
$45^\circ$ ja $54,74^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$
$54,74^\circ$ ja $90^\circ$	$\beta = -0,9943$	$\beta = 0$	$\beta = 0,4971$	$\beta = 0,9943$	$\beta = 1,9886$

Taulukko 6: Kulmaparametrin  $\beta$  virheprosentti, kun detektori oletetaan pistemäiseksi,  $0 < \omega_e < 5^\circ$  ja  $0 < \phi_e < 360^\circ$ .

$\beta'$	$\beta$	Virhe $\frac{\beta-\beta'}{\beta'} \cdot 100\%$
-1	-0,9943	-0,570
0	0	0
0,5	0,4971	-0,570
1	0,9943	-0,570
2	1,9886	-0,570

Taulukon 6 tulosten perusteella voidaan todeta, että  $\beta$ :lle aiheutuu  $-0,570\%$  virhe, kun detektori oletetaan pistemäiseksi ja  $\beta \neq 0$ .



## 8 Yhteenveto

Fotoionisaatiossa atomeista ja molekyyleistä irronneiden elektronien kulmajakaumat noudattavat yhtälöä

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{lin,pol} = \frac{\sigma}{4\pi} \left(1 + \beta P_2(\cos \theta)\right),$$

kun ionisoivat valon aallonpituus on paljon suurempi kuin atomin koko ja valo on täydellisesti lineaarisesti polarisoitunutta. Yhtälössä  $\theta$  on sähkömagneettisen säteilyn polarisaatiovektorin ja elektronin nopeusvektorin välinen kulma ja  $\beta$  anisotropia- eli kulmajakaumaparametri.

Tämän tutkielman tarkoituksena oli selvittää, millainen virhe kulmajakaumaparametriin aiheutuu, kun elektroneja havaitseva detektori oletetaan pistemäiseksi, vaikka todellisuudessa detektori havaitsee elektroneja tietyllä kulma-aukeamalla  $[\theta - d\theta, \theta + d\theta]$ .

Kun halutaan nimenomaan tutkia kulmajakaumaparametria  $\beta$ , fotoionisaatiospektri (eli differentiaalisen vaikutusalan  $d\sigma/d\Omega$ ) mitataan kahdessa eri kulmassa, eli esimerkiksi siten, että polarisaatiovektorin ja elektronin nopeusvektorin välinen kulma on ensin  $0^\circ$  ja sitten  $90^\circ$ . Muita mahdollisia kulman arvoja ovat  $45^\circ$  ja  $54,74^\circ$ , jota käytetään, kun halutaan mitata fotoelektronisepektri, jossa havaittujen orbitaalien intensiteetit eivät riipu  $\beta$ -parametrista.

Hyödyntämällä pallotrigonometrian ja Legendren polynomien ominaisuuksia saadaan osoitettua, että kulmajakaumaparametriin aiheutuu virhettä, kun detektori oletetaan pistemäiseksi. Esimerkiksi, jos oletamme detektorin olevan ympyrämäinen, niin virheen ylärajaksi saadaan noin  $-5\%$ . Toisin sanoen kulmajakaumaparametrin arvo pienenee hieman, kun ympyrämäisen detektorin oletetaan olevan pistemäinen ja todelliset kulmajakaumaparametrin arvot ovat positiivisia.

Syy siihen, miksi ongelman ratkaisemiseen tarvitaan Legendren polynomeja on nähtävissä, kun tutkitaan kolmiulotteista kvanttimekaniikkaa. Kvanttimekaniikasta tuttujen aaltofunktioiden lausekkeissa esiintyy Legendren polynomeja, kun ratkaistavana on aaltofunktion kulmaosan yhtälö. Lisäksi aaltofunktioissa esiintyvät kvanttiluvut ovat yhteydessä kulmajakaumaparametriin, sillä tämän arvo riippuu ionisoitavien orbitaalien muodosta, joka puolestaan riippuu kvanttiluvuista.

Nykyään detektoreita suunnitellaan siten, että se havaitsee elektroneja mahdollisimman suurella kulma-aukeamalla. Näin ollen on hyvä tiedostaa, että oletus pistemäisestä detektorista aiheuttaa kulmajakaumaparametrin arvolle useamman prosentin virheen.

## Lähdeluettelo

- [1] N. S. Koshlyakov, M. M. Smirnov, E. B. Gliner, *Differential equations of mathematical physics*, New York: John Wiley & Sons, 1964.
- [2] L. Vaidman, *Quantum Theory and Determinism*, Raymond and Beverly Sackler School of Physics and Astronomy, Tel-Aviv University, Israel, 2014.
- [3] Isaac Todhunter, *Spherical Trigonometry - For The Use Of Colleges And Schools, With Numerous Examples*, 5th. edition, Lontoo: MacMillan & Co., 1886.
- [4] S. L. Belousov, *Normalized associated Legendre polynomials*, Oxford, Lontoo, New York, Pariisi: Pergamon Press, 1962.
- [5] F. Paxton, *Solid Angle Calculation for a Circular Disk*, Rev. Sci. Instrum. 1959;30(4):254-8.
- [6] David J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, New Jersey: Prentice Hall, 1995.
- [7] S. Heikkilä, M. Kumpulainen, J. Oinas *Differentiaaliyhtälöt II*, Luentomoniste, versio 6.5.2009, Matemaattisten tieteiden laitos, Oulun yliopisto; 2009.
- [8] Adel A. El-Sayed, Praveen Agarwal, *Numerical solution of multiterm variable-order fractional differential equations via shifted Legendre polynomials*, Math Meth Appl Sci. 2019;42:3978–91.
- [9] S. R. Schach, *New identities for Legendre associated functions of integral order and degree*, University of Cape Town, Etelä-Arfrikka; 1973.
- [10] S-H. Dong, R. Lemus *The Overlap Integral of Three Associated Legendre Polynomials*, Applied Mathematics Letters. 2002;15:541-46.
- [11] S. Chapman, J. Bartels, *Geomagnetism: 2 Analysis of the Data and Physical Theories*, Oxford: Clarendon Press, 1940.
- [12] D. E. Winch, D. J. Ivers, J. P. R. Turner, R. J. Stening, *Geomagnetism and Schmidt quasi-normalization*, Geophys. J. Int. 2005;160:487–504.
- [13] D. E. Winch, P. H. Roberts, *Derivatives of addition theorems for Legendre functions*, J. Austral. Math. Soc. Ser. B 1995;37:212-34.

- [14] Jean Gallier, *Notes on Spherical Harmonics and Linear Representations of Linear Groups*, Department of Computer and Information Science, University of Pennsylvania, 2013.
- [15] Arthur Beiser, *Concepts of Modern Physics*, 6th. edition, New York: McGraw-Hill, 2003.
- [16] Nicholas Wheeler, *Algebraic theory of spherical harmonics*, Reed College Physics Department, Oregon, 1996.
- [17] Mikko Saarela, *Kvanttimekaniikka I-Johdatus alkuaineiden jaksolliseen järjestelmään* Luentomoniste, versio 5.9.2012, Fysikaalisten tieteiden laitos, Oulun yliopisto; 2012.
- [18] J. H. D. Eland, *Photoelectron Spectroscopy* 2th. editon, Lontoo; Butterworths, 2017.